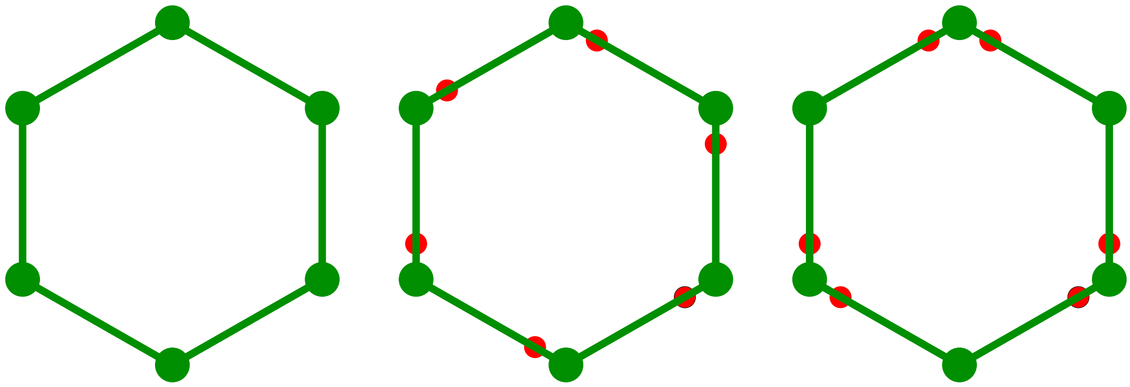
NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE
UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Eksamen gitt av Kåre Olaussen

Løsningsforslag til
Eksamen i fag DIF4984 Anvendelse av symmetrigrupper i fysikken
Fredag 17. desember 1999
Tid: 09:00—15:00

Oppgave 1:



A **B** **C**

a) Betrakt de tre figurene **A–C** over som to-dimensjonale (planare) strukturer. Beskriv for hver av figurene mengden av transformasjoner som avbilder figuren på seg selv.

A: Enhetstransformasjonen E (gjør ingenting), C_6, C_3, C_2, C_3^{-1} og C_6^{-1} (rotasjoner med henholdsvis 60°, 120°, 180°, 240° og 300°), σ_1, σ_2 og $\sigma 3$ (speilinger i tre vertikale plan gjennom diametralt motsatte punkter), og σ_{d1}, σ_{d2} og σ_{d3} (speilinger i tre vertikale plan gjennom midtpunktene av diametralt motsatte sidekanter). Ialt 12 transformasjoner (som danner gruppen C_{6v}).

B: Enhetstransformasjonen E (gjør ingenting), C_6, C_3, C_3, C_3^{-1} og C_6^{-1} (rotasjoner med henholdsvis 60°, 120°, 180°, 240° og 300°). Ialt 6 transformasjoner (som danner gruppen C_6).

C: Enhetstransformasjonen E (gjør ingenting), C_3, og C_3^{-1} (rotasjoner med henholdsvis 120° og 240°), og σ_1, σ_2 og $\sigma 3$ (speilinger i tre vertikale plan gjennom diametralt motsatte punkter). Ialt 6 transformasjoner (som danner gruppen C_{3v}).

b) Hvilke betingelser må være oppfylt for at en mengde av transformasjoner skal utgjøre en gruppe? Hvilke betingelser må være oppfylt for at en mengde av transformasjoner skal utgjøre en *abelsk* gruppe? For at mengden skal utgjøre en gruppe må den (i) være *lukket* (dvs. at for hvert ordnet par av transformasjoner i mengden må sammensetningen av de to også være i mengden), (ii) inneholde enhetstransformasjonen, og (iii) inneholde den inverse transformasjonen til hvert element i mengden.

Kommentar: Gruppeaksiomene krever også *assosiativitet*, dvs. at

$$(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$$

for sammensetningen av alle mulige gruppe-elementer a, b, c. Dette er automatisk oppfylt for transformasjoner (det spiller ingen rolle når vi tar pause).

For at mengden skal utgjøre en *abelsk* gruppe må (i tillegg til betingelsene over) rekkefølgen vi sammensetter transformasjoner ikke ha betydning for sluttresultatet.

c) Hvilke av mengdene over utgjør en gruppe? Hvilke av mengdene over utgjør en *abelsk* gruppe?

Alle mengdene i punkt **a** utgjør grupper. Gruppen blir abelsk for (og bare for) tilfelle **B**.

d) Se nærmere på mengden av transformasjoner for figur **A**. Beskriv sammensetningsreglene ("multiplikasjonstabellen") for disse transformasjonene.

C_{6v}	E	C_6	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5	σ_1	σ_2	σ_3	σ_{1d}	σ_{2d}	σ_{3d}
E	E	C_6	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5	σ_1	σ_2	σ_3	σ_{1d}	σ_{2d}	σ_{3d}
C_6	C_6	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5	E						
C_6^2	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5	E	C_6						
C_6^3	C_6^3	C_6^4	C_6^5	E	C_6	C_6^2						
C_6^4	C_6^4	C_6^5	E	C_6	C_6^2	C_6^3						
C_6^5	C_6^5	E	C_6	C_6^2	C_6^3	C_6^4						
σ_1	σ_1						E					
σ_2	σ_2							E				
σ_3	σ_3								E			
σ_{1d}	σ_{1d}									E		
σ_{2d}	σ_{2d}										E	
σ_{3d}	σ_{3d}											E

e) Hva er den matematiske betingelsen for at to gruppe-elementer skal være *konjugerte*? Hva betyr dette rent fysisk når gruppe-elementene kan tolkes som transformasjoner?

To gruppe-elementer h og k er konjugerte ($h \sim k$) dersom det finnes et gruppe-element g slik at

$$h = g\,k\,g^{-1}. \tag{1}$$

Transformasjoner som svarer til konjugerte gruppe-elementer er fysisk sett identiske, men utført i et transformert system. F. eks. to rotasjoner med samme vinkel utført om akser som er transformert i forhold til hverandre, eller speilinger i to plan som er transformert (f. eks. rotert) i forhold til hverandre.

f) Inndel mengden av transformasjoner for figur **A** i konjugasjonsklasser.

Konjugasjonklassene er

$$\{E\},\ \{C_6, C_6^{-1}\},\ \{C_3, C_3^{-1}\},\ \{C_2\},\ \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\},\ \text{og}\ \{\sigma_{d1}, \sigma_{d2}, \sigma_{d3}\}. \tag{2}$$

g) Hva menes det med *representasjoner* for en gruppe? Hva vil det at en representasjon er *irredusibel*? Hva menes det med *karakteren* for en representasjon?

En representasjon er avbildning fra gruppen til et sett av matriser,

$$g \to \mathcal{D}(g)$$

som respekterer gruppesammensetningsregelen

$$g_1\, g_2 \to \mathcal{D}(g_1\, g_2) = \mathcal{D}(g_1)\, \mathcal{D}(g_2)$$

En representasjon er irredusibel dersom det ikke er mulig å blokkdiagonalsere alle matrisene $\mathcal{D}(g)$. Karakteren $\chi(g)$ til en representasjon er lik sporet (summen av diagonalelementene) til representasjonsmatrisen,

$$\chi(g) = \mathrm{Tr}\, \mathcal{D}(g). \tag{3}$$

h) Hva er sammenhengen mellom antall (inekvivalente) irredusible representasjoner og antall konjugasjonsklasser for en gruppe? Hvor mange irredusible representasjoner har transformasjonsgruppen for figur **A**? Av hvilke dimensjonaliteter må disse være?

Antallet inekvivalente irredusible representasjoner er lik antallet konjugasjonsklasser. Transformasjonsgruppen for figur **A** har 6 konjugasjonsklasser, så den må ha 6 inekvivalente irredusible representasjoner. Disse må ha dimensjonaliteter d_i, $i = 1, \ldots, 6$, slik at

$$\sum_{i=1}^{6} d_i^2 = 12 \quad \text{(antallet elementer i gruppen)}.$$

Ved direkte prøving og feiling finner man at dette har løsning

$$d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = 1, \quad d_5 = d_6 = 2. \tag{4}$$

Altså må har gruppen 4 éndimensjonale og 2 todimensjonale irredusible representasjoner.

i) Konstruer karaktertabellen for transformasjonsgruppen for figur **A**.

C_{6v}	$\{E\}$	$\{2C_6\}$	$\{2C_3\}$	$\{C_2\}$	$\{3\sigma\}$	$\{3\sigma_d\}$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
E_1	2	1	-1	-2	0	0
E_2	2	-1	-1	2	0	0

j) Anta at figurene først i denne oppgaven illustrerer symmetrien til tre 2-dimensjonale kvantebrønner, konstruert slik at potensialet kan regnes å være null i de markerte områdene, og uendelig utenfor. Med potensialet **A** kan systemet ha degenererte tilstander. Hva vil (generelt) skje med degenerasjonen av disse tilstandene dersom potensialet endres til å ha symmetri (i) som i **B**, (ii) som i **C**?

I tilfelle (i) vil degenerasjonen oppheves fordi symmetrien reduseres til C_6, som bare har én-dimensjonale representasjoner.

I tilfelle (ii) vil degenerasjonen bestå fordi verken E_1 eller E_2 splittes når symmetrien reduseres til C_{3v}. Når vi evaluerer karakterene på de konjugasjonsklassene som overlever symmetri-reduksjonen får vi

	$\{E\}$	$\{2C_3\}$	$\{3\sigma\}$
E_1	2	-1	0
E_2	2	-1	0

Dette er presis karakteren for den to-dimensjonale irredusible E-representasjonen av C_{3v}.

Oppgave 2:

Anta at vi har en ladet spinn-0 partikkel i et rotasjonssymmetrisk potensial $V(r)$, med dynamikk beskrevet av Schrödinger-ligningen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right] \Psi(\vec{r},t) \tag{5}$$

a) List opp alle rom-tid symmetriene for dette systemet, og angi de tilsvarende transformasjonslovene

$$\Psi(\vec{r},t) \to \Psi'(\vec{r},t)$$

for bølgefunksjonen.

Systemet er invariant under

- **Rotasjoner:**

$$\vec{r} \to \vec{r}' = R\vec{r}, \quad \Psi(\vec{r},t) \to \Psi'(\vec{r},t) = \Psi(R^{-1}\vec{r},t), \tag{6}$$

  der R er en 3×3 ortogonal matrise.

- **Rom-inversjon:**

$$\vec{r} \to \vec{r}' = -\vec{r}, \quad \Psi(\vec{r},t) \to \Psi'(\vec{r},t) = \Psi(-\vec{r},t). \tag{7}$$

- **Tids-translasjon:**

$$t \to t' = t + \tau, \quad \Psi(\vec{r},t) \to \Psi'(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},t-\tau), \tag{8}$$

- **Tids-reversjon:**

$$t \to t' = -t, \quad \Psi(\vec{r},t) \to \Psi'(\vec{r},t) = \Psi^*(\vec{r},-t), \tag{9}$$

  der * betyr kompleks konjugasjon.

b) Hvilke degenerasjonsgrader forventer du at man generelt skal finne i energi-spekteret i dette systemet?

Pga. rotasjonsinvarians forventer vi at energinivåene skal kunne klassifiseres etter irredusible representasjoner av rotasjonsgruppen, dvs. av en dreieimpuls $L = 0, 1, 2, \ldots$. Disse representasjonene har degenerasjonsgrad $D_L = 2L + 1$, som altså er odde tall. De andre rom-tids symmetriene gir ikke opphav til ekstra degenerasjon (hvertfall ikke for spinn-0 systemer). Invarians under tidstranslasjon er nødvendig for at vi overhodet skal ha veldefinerte energinivåer.

c) For hydrogenlignende atomer kan potensialet $V(r)$ settes til

$$V(r) = -\frac{K_1}{r}, \tag{10}$$

der K_1 er en konstant. Da viser det seg at energinivåene er

$$E_n = -\frac{K_2}{n^2}, \quad n = 1, 2, \ldots,$$

der K_2 er en konstant, og n'te nivå har en degenerasjonsgrad på n^2. Kan dette forklares ut fra rom-tids symmetriene i første punkt? Dvs, vil degenerasjonen av spekteret være uforandret dersom systemet perturberes med et generelt rotasjonssymmetrisk potensial $\Delta V(r)$?

Siden $n^2 = 1, 4, 9, 16, \ldots$ generelt ikke er et odde tall kan det ikke være bare rom-tids symmetriene over som bestemmer degenerasjonsgraden. Uten å vite noe mer om hydrogenlignende atomer kan vi si atom hvertfall alle nivåer med like n må vil splitte opp.

Kommentar: Faktum (som burde være velkjent fra grunnkurs i kvantemekanikk) er at n'te nivå er satt sammen av tilstander med dreieimpuls $L = 0, 1, \ldots, n-1$. Dette gir degenerasjonsgrad

$$D_n = \sum_{L=0}^{n-1} (2L + 1) = n^2, \tag{11}$$

som stemmer.

Årsaken til den ekstra degenerasjonen er en O(4) faseroms-symmetri som er spesiell for Coulomb-systemet.

d) For et harmonisk system kan potensialet $V(r)$ settes til

$$V(r) = K_3 r^2, \tag{12}$$

der K_3 er en konstant. Da viser det seg at energinivåene er

$$E_n = \left(\frac{3}{2} + n\right) K_4, \quad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

der K_4 er en konstant, og n'te nivå har en degenerasjonsgrad på $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$. Kan dette forklares ut fra rom-tids symmetriene i første punkt? Dvs, vil degenerasjonen av spekteret være uforandret dersom systemet perturberes med et generelt rotasjonssymmetrisk potensial $\Delta V(r)$?

Degenerasjonene

$$\frac{1}{2}(n+1)(n+2) = 1, 3, 6, \ldots$$

er heller ikke alltid lik odde tall, så de kan heller ikke være bestemt alene av rom-tids symmetriene over. Uten å vite noe mer om partikler i et harmonisk potensial kan vi si at hvertfall noen av nivåene vil måtte splitte opp.

Kommentar: Det er muligens mindre kjent (og kandidatene var hvertfall ikke forventet å vite det), men faktum er at nivåer med like n er satt sammen av tilstander med like dreieimpuls, $L = 0, 2, \ldots, n$, og nivåer med odde n er satt sammen av tilstander med odde dreieimpuls, $L = 1, 3, \ldots, n$.

Årsaken til den ekstra symmetrien er at Hamiltonfunksjonen for systemet (etter passende skalering) kan skrives

$$H = \frac{1}{2}\left(\vec{p}^2 + \vec{r}^2\right), \tag{13}$$

som er invariant under O(6)-rotasjoner av den 6-dimensjonale vektoren $(\vec{p}, \vec{r})$. Nå er ikke symmetrigruppen riktig så stor som O(6), for det er ikke alle transformasjonene over som er konsistente med kommuteringsrelasjonene mellom $\vec{p}$ og $\vec{r}$. Den virkelige symmetrigruppen er SU(3).

e) Det generelle systemet (5) blir perturbert av et svakt elektrisk felt i z-retningen,

$$V(r) \to V(r) + qE\,z.$$

Forklar hvilke rom-tid symmetrier som gjenstår i dette tilfellet. Hvordan vil en opprinnelig 5-fold degenerert tilstand splitte opp?

Den fullstendige rotasjons-symmetrien reduseres til symmetri under rotasjonener om z-aksen. Symmetrien under rom-inversjon bryter også sammen, men det gjenstår symmetri under speiling i alle vertikale plan gjennom z-aksen. Den mest interessante gjenværenede symmetrien er derfor $C_{\infty v}$. I tillegg består symmetrien under tids-translasjon og tids-reversjon.

Karakteren til en 5-fold degenerert tilstand (med dreieimpuls $L = 2$ og like paritet) var oppgitt i vedlegget til å være

$$\chi(\theta) = \frac{\sin(5\theta/2)}{\sin(\theta/2)} = 1 + 2\cos\theta + 2\cos 2\theta \tag{14}$$

Hvis man sammenligner dette med den vedlagte karaktertabellen for $D_{\infty h} = C_{\infty v} \times C_i$, finner man

$$\chi = A_1 + E_1 + E_2. \tag{15}$$

Dette betyr at den 5-fold degenererte tilstanden vil splitte opp i 1 én-dimensjonal og 2 to-dimensjonale tilstander.

f) Det generelle systemet (5) blir perturbert av et magnetisk felt i z-retningen,

$$\nabla \to \nabla + \frac{iqB}{2\hbar}\,\hat{e}_z \times \vec{r}.$$

Forklar hvilke rom-tid symmetrier som gjenstår i dette tilfellet. Hvordan tror du en opprinnelig 5-fold degenerert tilstand vil splitte opp?

Vi beholder symmetri under rotasjon om z-aksen, speiling i horisontalplanet, og tid-translasjon. Symmetriene under speiling i vertikale plan og under tidsreversjon bryter separat sammen, men vi beholder symmetri under den kombinerte transformasjonen. Den romlige symmetrigruppen kan derfor sies å være $D_{\infty h}$. Men siden man må involvere tidsreversjon, og derfor anti-unitære operatorer i for å representere symmetrien, kan man ikke bruke den vanlige analysen for å dedusere hvordan den 5-fold degenererte vil splitte opp.

Det riktige svaret er at man generelt kan forvente full oppsplitting til fem separate nivåer, istedet for en oppsplitting til $1 + 2 + 2$ som prediktert av vanlig $D_{\infty h}$ symmetri.

g) Det generelle systemet (5) blir perturbert av et kubisk krystallfelt,

$$V(r) \to V(r) + \lambda\left(x^4 + y^4 + z^4\right).$$

Forklar hvilke rom-tid symmetrier som gjenstår i dette tilfellet. Hvordan vil en opprinnelig 5-fold degenerert tilstand splitte opp?

Romsymmetrien reduseres i dette tilfellet til den kubiske gruppen $\mathrm{O}_h = \mathrm{O} \times \mathrm{C}_i$. For å finne oppsplittingen er det tilstrekkelig å analysere O-faktoren av denne gruppen.

O	E	$6C_4$	$3C_4^2$	$6C_2'$	$8C_3$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	−1	1	−1	1
E	2	0	2	0	−1
T_1	3	1	−1	−1	0
T_2	3	−1	−1	1	0
χ	5	−1	1	1	−1

Ved inspeksjon (eller fra de generelle ortogonalitetsrelasjonene for karakterer) ser man at $\chi = \mathrm{E} + \mathrm{T}_2$. Den 5-fold degenererte tilstanden vil derfor splitte opp i 2-fold degenerert og en 3-fold degenerert tilstand.

h) Hva menes med *Kramers degenerasjon*, og under hvilke betingelser vil denne inntreffe?

Kramers degenersjon opptrer når vi har et system med et odde antall spin-$\frac{1}{2}$ partikler, som også er invariant under tidsreversjon. Da vil alle tilstander ha en like degenerasjonsgrad $2n$.

i) Spinn–0 partikkelen over byttes ut med et spinn–$\frac{1}{2}$ elektron. I hvilke av tilfellene over vil energi-spekteret ha Kramer's degenerasjon?

Kramers degenerasjon vil inntreffe i alle tilfellene unntatt når vi har magnetfelt tilstede, for da er ikke systemet invariant under tidsreversjon.